



TITLE:

新規ラジカル重合の開発

AUTHOR(S):

藤田, 健弘

CITATION:

藤田, 健弘. 新規ラジカル重合の開発. 京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 10-10

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241139>

RIGHT:

新規ラジカル重合の開発

Development of new radical polymerization

京都大学化学研究所 高分子制御合成領域

藤田健弘

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、新規モノマーを用いたラジカル重合の開発に関わる分子設計を行った。

これまで、新規モノマーの置換基を変えることで大きく反応性が変わる事が実験的に明らかになっている。これらの反応性の差を調べるために、**Gaussian** ソフトウェアを用いてモノマーの最安定構造を求めた。得られた構造を用いることで反応性の差を説明することが出来た。さらに、この結果に基づいて置換基の構造をデザインした。今後は、重合機構を明らかにするために計算サーバーを利用する予定である。